

УПРАВЛЕНИЕ СВОЙСТВАМИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ. ПЕРКОЛЯЦИОННЫЙ ПОДХОД

А. Н. Герсга, В. Н. Выровой, Одесская государственная академия холода, Одесская государственная академия строительства и архитектуры

В статье представлены две идеологически связанные модели: модель силовых полей в гетерогенной среде и мезоскопическая модель трещинообразования.

Формирование кластеров в гетерогенных материалах – это многофакторный процесс, допускающий определённый уровень управления.

Свойства кластеров, закладываемые на начальной стадии формирования, в большой степени определяют величина и форма, количество и распределение по размерам, а также взаимодействие малых кластеров.

С определённого момента кластеры, определяемые как некая совокупность частиц, индивидуальные свойства которых трансформируются в свойства кластера, становятся объектами промежуточной асимптотики, обладающими статистическим самоподобием, что приводит, при достижении определённой концентрации кластеров, к скачкообразному изменению свойств материала. Такой фазовый переход II рода – это пример явления, в котором геометрические характеристики определяют физические свойства и структуру материала. Физической причиной этих модификаций могут быть возникновение внутренних поверхностей раздела, трещин и т.п.

Напряжённый и устойчивый интерес специалистов в области математики, материаловедения и физики на протяжении последних десятилетий к перколяционным явлениям легко объясняется очевидной важностью изучения критических явлений: вблизи точки фазового перехода, благодаря большим размерам кластеров, геометрия системы фактически не зависит от вещества, а обладает универсальными свойствами, присущими системам различной природы.

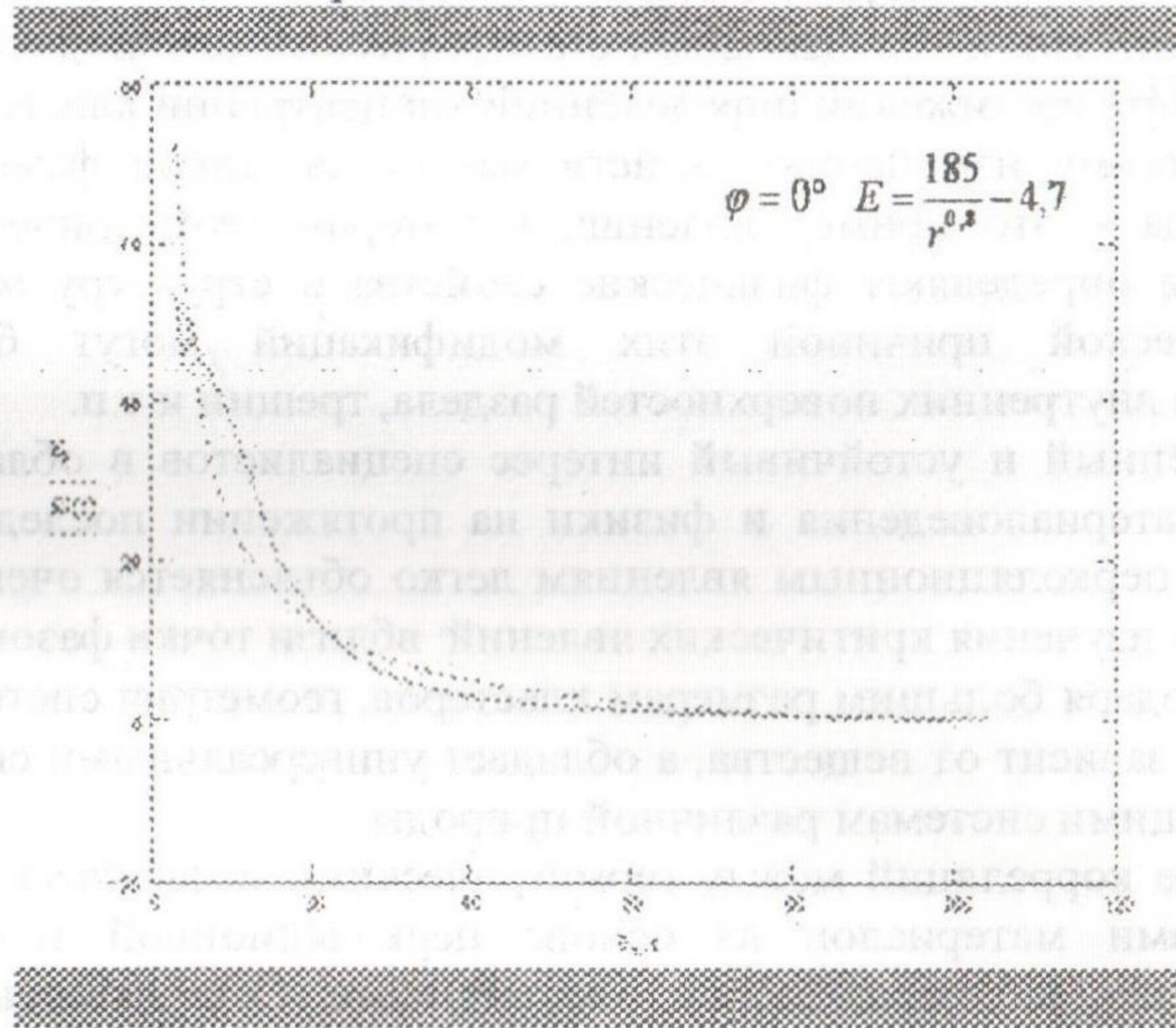
Изучение корреляций между геометрическими и физическими характеристиками материалов на основе перколяционной теории удобно проводить в компьютерном эксперименте. Основываясь на методе Монте-Карло, можно моделировать процесс формирования

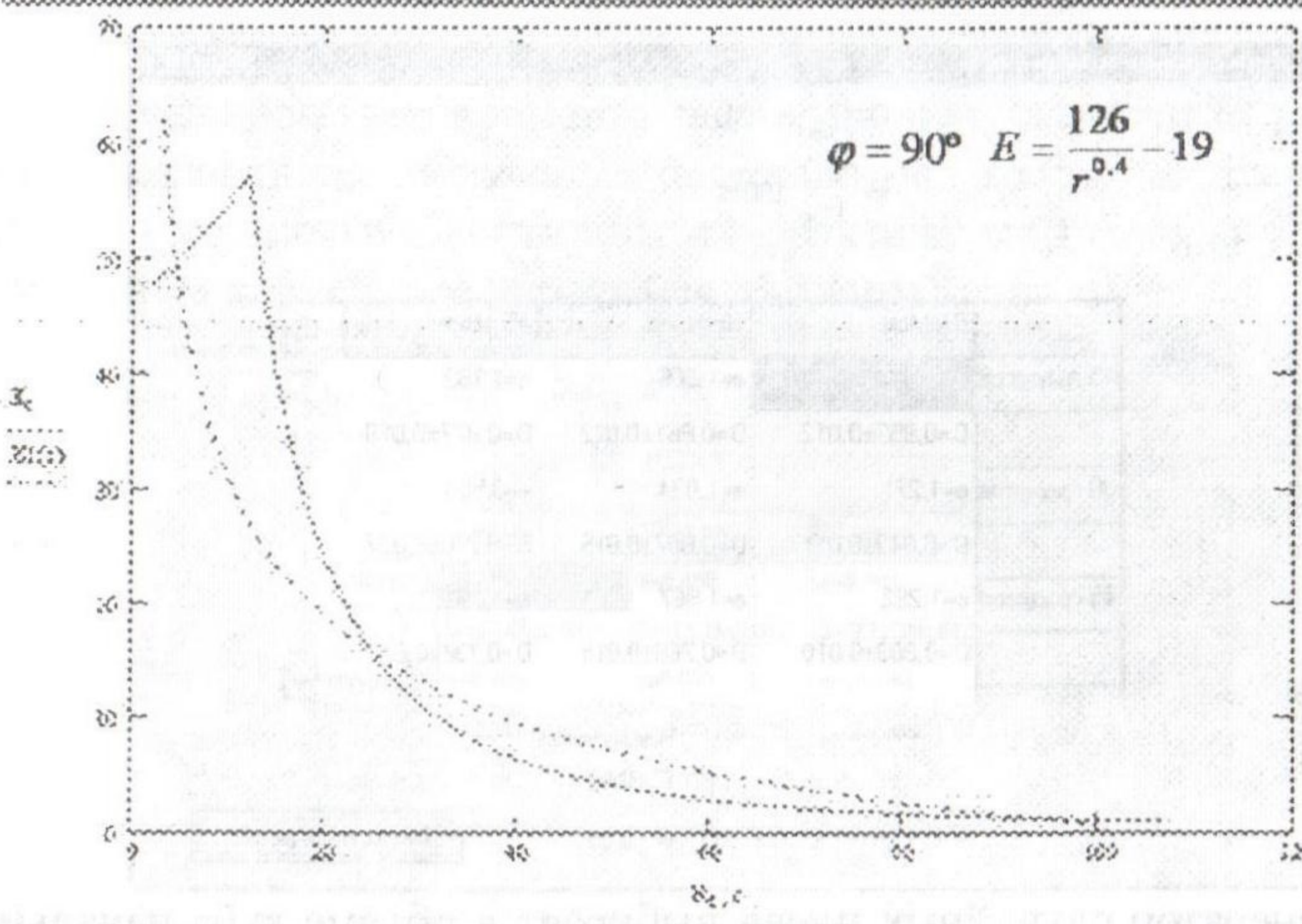
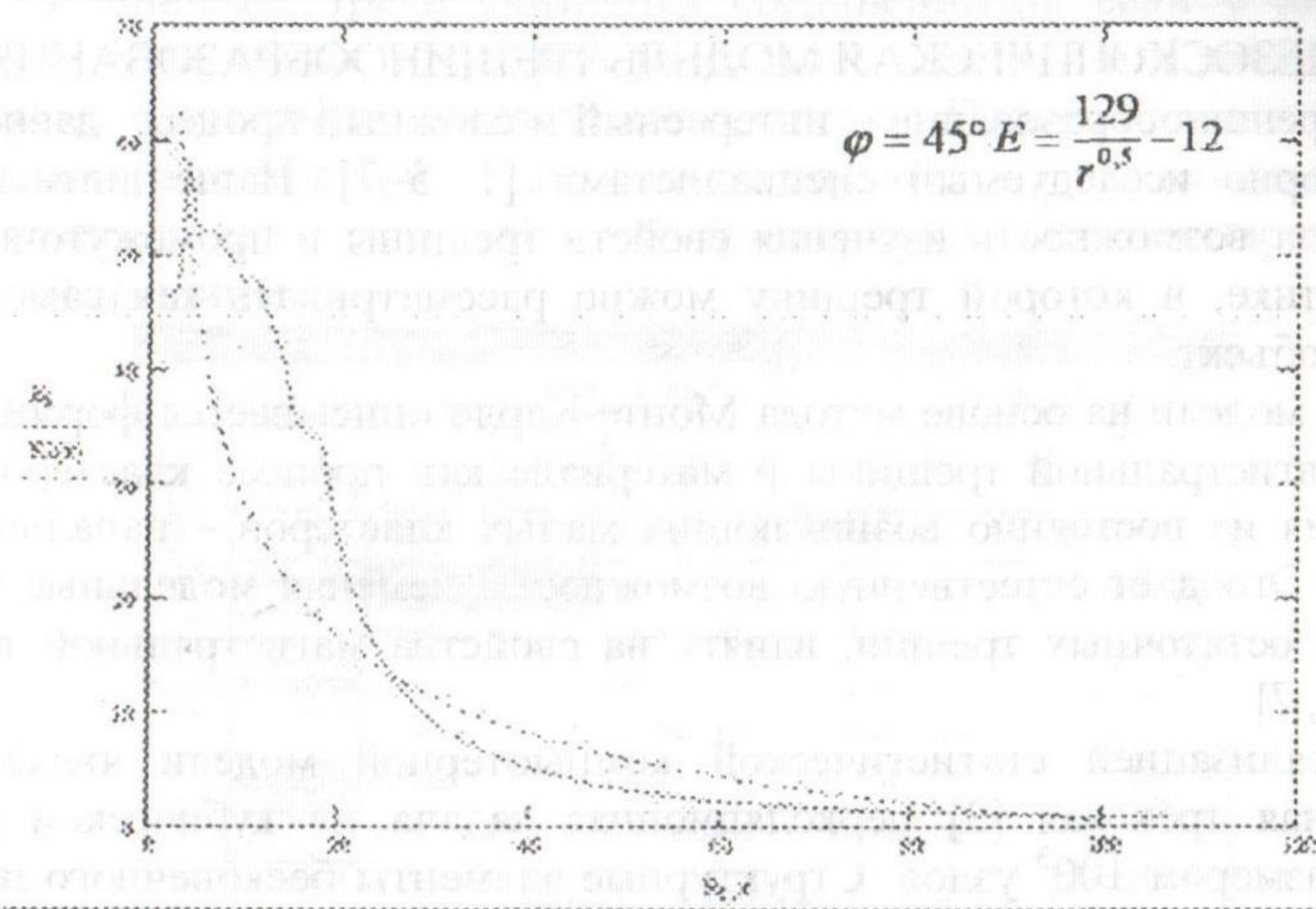
бесконечного перколяционного кластера в неоднородной среде. Такой подход позволяет, в частности, построить силовые поля, создаваемые кластерами, рассчитать их характеристики. Это открывает возможности построения и исследования модели взаимодействия перколяционных кластеров, вопроса о наличии связи между индексом в зависимости от характеристик силовых полей, созданных перколяционным кластером, от расстояния и набором размерностей А. Реньи бесконечного кластера.

МОДЕЛЬ СИЛОВЫХ ПОЛЕЙ В ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ

В работе моделируются поля механических напряжений той части гетерогенной среды, доля и структура которой позволяют рассматривать её как вкрапление кластеров в матрицу основного вещества.

В основу физической модели взаимодействия фаз положен закон изменения с расстоянием механических напряжений от точечного источника и его модификации, учитывающие структуру и формы кластера [1–3]. В модели предложен метод расчёта напряжений, возникающих во фрактальной структуре. Кластер рассматривается как тело произвольной формы и переменной плотности. По теореме о проекции силы притяжения многогранником внешней материальной точки [4] рассчитываются потенциальные поля взаимодействия между частями фрактального кластера.





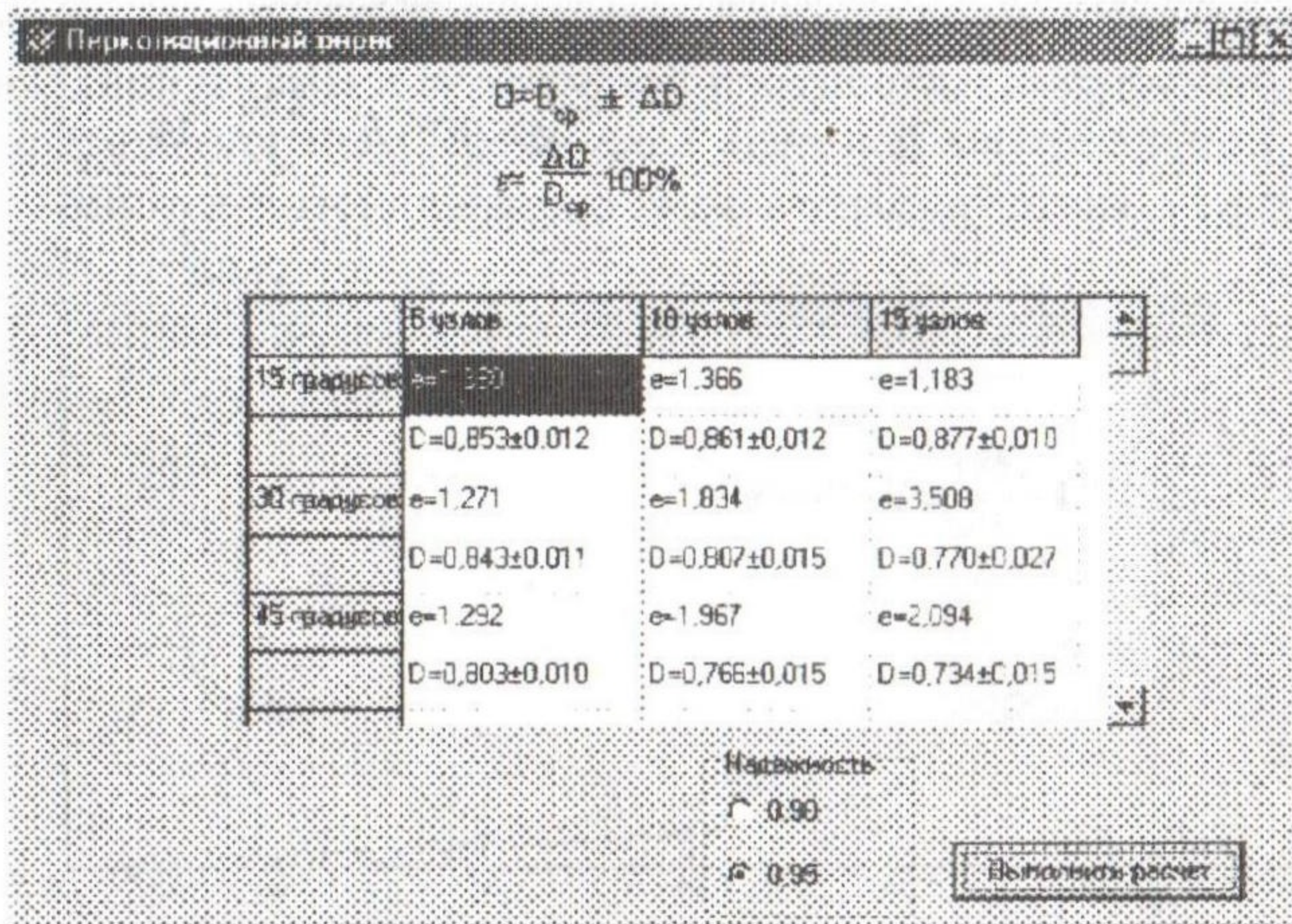
Компьютерная реализация предложенной модели позволяет построить поля напряжённости и рассчитать их характеристики. Результаты представлены на графиках, где введены следующие обозначения: E – величина напряженности поля, φ – угол между исследуемым и выделенным направлением, возникшем в результате фазового перехода.

МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТРЕЩИНООБРАЗОВАНИЯ

Трещинообразование – интересный и сложный процесс, давно и плодотворно исследуемый специалистами [1, 5–7]. Наше внимание привлекла возможность изучения свойств трещины в промежуточной асимптотике, в которой трещину можно рассматривать как самоподобный объект.

В модели на основе метода Монте-Карло описывается формирование магистральной трещины в материале как процесс кластерообразования из постоянно возникающих малых кластеров – начальных трещин. Это дает естественную возможность, изменяя модельные параметры остаточных трещин, влиять на свойства магистральной трещины [6, 7].

Реализацией статистической компьютерной модели является трехмерная трековая [3] перколяционная задача на кубической решетке размером 100^3 узлов. Структурные элементы бесконечного перколяционного кластера – треки – являются аналогами начальных трещин.



Генератор случайных чисел выбирает в объеме куба начальную координату трека, его длину и ориентационные углы. Длина треков выбирается случайно и может принимать значения 5, 10, 15 междоузельных расстояний, а вертикальная и горизонтальная составляющие угла отклонения случайным же образом выбираются из набора $\pm (15^\circ, 30^\circ, 45^\circ)$. Естественно, для описания ориентации начальной трещины к этому набору обращаются дважды.

Единичные треки считаются соединенными, если у них есть хотя бы одна общая точка или расстояние между ними равно минимальному расстоянию между узлами решетки. Процесс генерации кластера прекращается при возникновении связной области, соединяющей противоположные грани куба, что имитирует возникновение магистральной трещины.

Фрактальная размерность

$$D = D_{sp} + \Delta D$$

$$e = \frac{\Delta D}{D_{sp}} 100\%$$

	5 узлов	10 узлов	15 узлов	*
15 градусов	e=2,754	e=0,136	e=0,143	
	D=1,881±0,039	D=1,901±0,003	D=1,304±0,003	
30 градусов	e=0,143	e=0,174	e=2,085	
	D=1,901±0,003	D=1,888±0,003	D=1,858±0,039	
45 градусов	e=0,155	e=0,184	e=2,141	
	D=1,893±0,003	D=1,878±0,003	D=1,840±0,039	

Наклономость
 0,90
 0,95

Выполнить расчет

В модельном эксперименте исследовались различные режимы кластерообразования, получены бесконечные кластеры различной структуры и мощности, рассчитаны их фрактальные размерности, перколяционные и кластерные пороги (см. таблицы).

Кластерный порог

$$D = D_{sp} + \Delta D$$

$$e = \frac{\Delta D}{D_{sp}} 100\%$$

	5 узлов	10 узлов	15 узлов	*
15 градусов	e=7,893	e=8,458	e=8,401	
	D=0,147±0,012	D=0,139±0,012	D=0,123±0,010	
30 градусов	e=6,815	e=7,671	e=11,743	
	D=0,157±0,011	D=0,193±0,015	D=0,230±0,027	
45 градусов	e=5,283	e=6,433	e=5,788	
	D=0,197±0,010	D=0,234±0,015	D=0,266±0,015	

Наклономость
 0,90
 0,95

Выполнить расчет

Анализ представленных в таблицах результатов позволяет сделать несколько выводов:

- при фиксированной длине трека (для больших длин) увеличение максимального угла отклонения приводит к уменьшению

фрактальной размерности кластера, для малых длин треков – наблюдается её рост. При фиксированном максимальном угле отклонения треков (для больших углов (45°) с увеличением длины фрактальная размерность уменьшается. Для малых углов (15°) – наблюдается рост фрактальной размерности.

- при фиксированной длине трека с увеличением угла растёт величина кластерного порога. Для фиксированного значения максимального угла (при больших углах) с увеличением длины трека растёт величина кластерного порога. При малых углах – зависимость обратная.

- при фиксированной длине трека с увеличением максимального угла отклонения значение перколяционного порога падает. Для больших углов при фиксированном значении максимального угла величина перколяционного порога растёт с увеличением длины трека. При малых углах – зависимость обратная.

Обе модели авторы рассматривают как попытку описания многофакторных процессов ранней стадии формирования свойств материалов

Авторы благодарны коллегам А. М. Асланову и Л. Н. Халиловой за помощь в проведении расчётов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. – Киев: Наукова думка, 1981. – 328 с.
2. Б. Мандельброт Фрактальная геометрия природы – Москва, ИКИ – 2002 г. – 656 с.
3. Герега А. Н., Выровой В. Н., Ковдиенко Н. А., Шумакевич А. И. Компьютерное моделирование фрактальных кластеров в гетерогенных средах. // Моделирование в материаловедении. – Одесса, 1998. – С. 20-21.
4. Жуковский Н. Е. Теоретическая механика. – Москва, ГИТТЛ. – 1952 г. – 812 с.
5. Берлин А. А., Вольфсон С. А., Ошмян В. Г., Ениколопов Н. С. Принципы создания композиционных полимерных материалов. – М.: Химия, 1990. – 240 с.
6. Вознесенский В. А., Выровой В. Н., Керш В. Я. и др. Современные методы оптимизации композиционных материалов. – Киев: Будівельник, 1983. – 144 с.
7. Дорофеев В. С., Выровой В. Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. – Одесса, 1998. – 165 с.